

цитных перовскитоподобных кобальтитов  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Co}_{0.9}\text{Me}_{0.1}\text{O}_{3-\delta}$  ( $\text{Me}=\text{Ni}, \text{Fe}$ ).

*Работа выполнена при финансовой поддержке грантов: CRDF № ЕК–005–Х1, CRDF № ЕК–005–Х2[REC-005], BRHE 2004 post-doctoral fellowship award Y2-C-05-07, грант РФФИ–Урал 04–03–96136 и РФФИ–БНТС 03–03–20006 БНТС.*

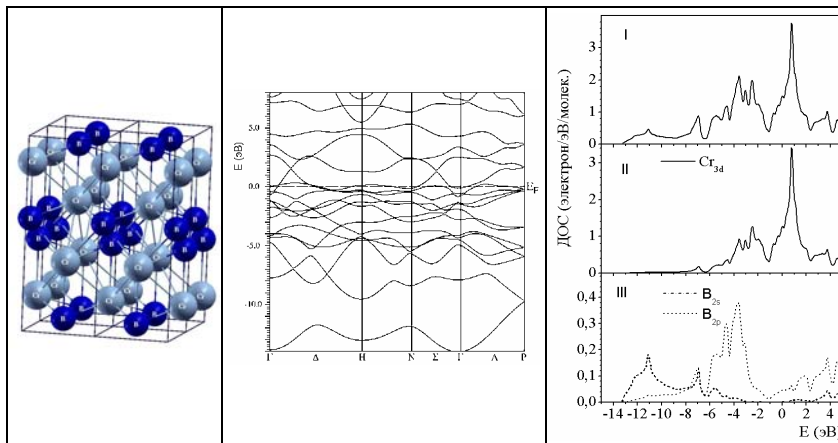
## ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ МОНОБОРИДОВ

### ВАНАДИЯ, ХРОМА, НИКЕЛЯ

Суетин Д. В., Шеин И. Р., Ивановский А. Л.

Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург

Керамические и пленочные материалы на основе моноборидов металлов (МВ) обладают интересной совокупностью термомеханических и электрофизических свойств, корректная интерпретация которых требует детальных исследований их электронных и упругих свойств. В данной работе представлены результаты расчетов электронной структуры и упругих констант моноборидов МВ ( $\text{M}=\text{V}, \text{Cr}, \text{Ni}$ ). Использован метод FLAPW-GGA (код WIEN2k). В качестве примера на рисунке представлены кристаллическая, зонная структуры, плотности состояний CrB. Видно, что на уровне Ферми ( $E_F$ ) доминируют  $\text{Cr}3d$  - состояния ( $\sim 93\%$ ) с примесью  $\text{B}2p$  – состояний ( $\sim 5\%$ ). Основной вклад в структуру валентной зоны вносят орбитали  $\text{Cr}3d\text{-B}2p$  (до  $-6$  эВ ниже  $E_F$ ) и орбитали  $\text{B}2s$  (от  $-6$  до  $-13$  эВ ниже  $E_F$ ). Магнитные моменты на атомах отсутствуют.



Для определения упругих констант МВ фаз их энергии  $E_{\text{tot}}$  рассчитаны при варьировании решеточных параметров (орторомбическая ячейка,

прост. группа  $C_{3v}$ ), раскладывались в степенной ряд и минимизировались нелинейным методом наименьших квадратов. Впервые получены модули упругости (6 компонент в орто-ромбической системе симметрии) и модули всестороннего сжатия (Реусса ( $B_R$ ), Войта ( $B_V$ ) и их средние ( $B$ )). Теоретические величины  $B$  находятся в хорошем соответствии с имеющимися экспериментальными данными. Обсуждается эволюция электронных и упругих свойств монокристаллов в зависимости от природы боридообразующего металла в ряду  $VB_2 \rightarrow CrB_2 \rightarrow NiB_2$ .

*Работа поддержана РФФИ, проект № 04-03-32082.*

## НЕСТЕХИОМЕТРИЯ И ДЕФЕКТНАЯ СТРУКТУРА $LaCr_{0.3}Co_{0.7}O_{3-\delta}$

*Карпов Е. Н., Цветков Д. С., Выхов А. И.*

Уральский государственный университет, Екатеринбург

Перовскитоподобный кобальтит лантана  $LaCoO_3$  обладает смешанной проводимостью с преобладанием электронной составляющей. Поэтому соединения на его основе могут использоваться как материалы для изготовления катодов твердооксидных топливных элементов,  $CO_2$  лазеров, кислородных мембран, катализаторов.

Свойства реальных твердых тел определяются их реальной (дефектной) структурой. Исследуя дефектную структуру, проводят измерение и моделирование какого-либо свойства. По степени корреляции экспериментальной и теоретической зависимостей судят о применимости выбранной модели для данной системы.

В качестве исследуемого соединения был выбран кобальтит лантана, допированный хромом, состава  $LaCr_{0.3}Co_{0.7}O_{3-\delta}$ . Была предложена модель дефектообразования, учитывающая большее сродство к электрону кобальта по сравнению с хромом.

Было проведено моделирование дефектной структуры и измерение нестехиометрии методом кулонометрического титрования в интервале  $-4 \leq \lg(P_{O_2}) \leq -0.68$ . При этом наблюдали увеличение нестехиометрии при повышении температуры и/или уменьшении давления кислорода. На основании полученных данных были рассчитаны мольные энтальпия и энтропия образования кислородных вакансий. При решении системы уравнений предложенной модели была получена аналитическая зависимость нестехиометрии от давления кислорода. При сглаживании данной кривой к экспериментальным точкам были получены значения констант квазихимических реакций, использованных в модели.

*Работа выполнена при поддержке грантов Мин. Обр. РФ № А04-2.11-848, РФФИ № 04-03-32118, РФФИ № 04-03-32142.*